ISSN 1813 - 6796
ВІСНИК КНУТД №2 (96), 2016

УДК 677.072.6

РЕЗАНОВА В.Г.
Київський національний університет технологій та дизайну

ОПТИМІЗАЦІЯ СКЛАДУ ЧОТИРИКОМПОНЕНТНИХ СУМІШЕЙ ПОЛІМЕРІВ ІЗ ЗАСТОСУВАННЯМ МЕТОДУ ШТРАФНИХ ФУНКЦІЙ

Мета. *Розв'язання задачі оптимізації складу чотирикомпонентних сумішей полімерів. Перетворення задачі умовної оптимізації на задачу безумовної оптимізації та подальше її розв'язання. Створення спеціального програмного забезпечення.*

Методика. *Перетворення задачі умовної оптимізації на задачу безумовної оптимізації здійснювалось методом штрафних функцій. Розв'язання отриманої задачі проводилось градієнтним методом із дробленням кроку. Програмне забезпечення розроблялося мовою Object Pascal у середовищі Delphi.*

Результати. *Розроблено математичне та програмне забезпечення для розв'язання задачі оптимізації складу чотирикомпонентних сумішей полімерів при реалізації специфічного волокноутворення.*

Наукова новизна. *Розроблене математичне та програмне забезпечення дозволяє розв'язувати задачі оптимізації складу чотирикомпонентних сумішей полімерів за допомогою методу штрафних функцій та градієнтного методу із дробленням кроку. Розв'язання задачі оптимізації є складовою частиною теоретичного дослідження специфічного волокноутворення.*

Практична значимість. *Застосування вищеописаних методів забезпечує знаходження оптимального складу чотирикомпонентної полімерної суміші, що дасть можливість отримувати ультратонкі модифіковані нановолокна з покращеними властивостями.*

Ключові слова*: волокноутворення, умовна оптимізація, безумовна оптимізація, метод штрафних функцій, градієнтний метод, програмне забезпечення.*

Вступ. Одним із основних критеріїв оцінки рівня науково - технічного прогресу в країні є ступінь використання полімерних матеріалів.

У наш час переробка розплавів сумішей полімерів є одним із перспективних методів одержання волокон з діаметрами від декількох до десятих долей мікрометра (явище специфічного волокно утворення [1], [2]). Змішування полімерів та введення спеціальних добавок - компатибілізаторів дозволяє не тільки поєднувати властивості двох компонентів, а й одержувати унікальні ефекти та нові матеріали з характеристиками, які непритаманні вихідним полімерам. У даний час нанотехнології є однією з найперспективніших та важливих галузей знань. У останні роки одним з перспективних напрямків техніки й науки є розроблення принципів отримання нанонаповнених волокон й нанокомпозитів. Введення у бінарну полімерну суміш компатибілізатора та модифікуючої нанодобавки призводить до необхідності розгляду чотирикомпонентної суміші полімерів.

Дані літератури (зокрема, [3], [4]) свідчать, що суміші з кількістю компонентів більше чотирьох майже не мають практичного застосування. Науковий та практичний інтерес представляють в основному три- та чотирикомпонентні системи. Розв'язання задачі оптимізації складу трикомпонентної суміші було здійснено автором раніше [5]. Було використано метод оптимізації за узагальненим критерієм бажаності – критерієм Харрингтона [4]. Даний метод є надзвичайно простим і зручним, але добре працює лише для досить простих систем, оскільки являє собою, по суті, перебір допустимих точок факторного простору з метою знаходження оптимальної. Для більш складних систем, якою є чотирикомпонентна суміш, він стає занадто громіздким і призводить до невиправдано великих витрат машинного часу та ресурсів. Тому необхідно шукати інший теоретично обґрунтований підхід до розв’язання даної задачі.

Явище специфічного волокноутворення досліджується на сьогоднішній день активними темпами, оскільки має великий науковий інтерес з точки зору створення загальної теорії процесів переробки сумішей полімерів. При цьому ступінь реалізації волокноутворення визначається значною мірою співвідношенням компонентів в суміші.

При створенні полімерних композицій керуються практичними міркуваннями, тобто емпіричний пошук випереджає розвиток теорії. Але лише науково обґрунтований підхід до вибору хімічної природи полімерів, їх співвідношення, знання закономірностей зміни макрореологічних властивостей суміші від її мікроструктури дасть можливість одержувати полімерні композиції з заданими властивостями.

Постановка завдання. Розглядаємо чотирикомпонентну сумішеву систему, яка складається із двох полімерів (волокноутворюючий – поліпропілен (ПП) та матричний – співполіамід (СПА) та двох добавок (компатибілізатор та модифікуюча нанодобавка). Дослідження суміші даного складу являє значний науковий та практичний інтерес, оскільки експериментально встановлено, що з неї можна отримувати волокна з новими надзвичайними властивостями. Знання оптимального складу суміші дасть змогу науково-обгрунтовано підійти до процесу волокноутворення і отримати волокна із найкращими властивостями [6].

Вмісти компонентів суміші: x_1 – вміст ПП; x_2 – вміст СПА; x_3 – вміст компатибілізатора; x_4 – вміст нанодобавки. На вміст компонентів в суміші накладено певні обмеження.

Контроль якості отриманого полімерного композиту відбувається за наступними показниками: y_1 – середній діаметр мікроволокон; y_2 – масова частка безперервних волокон; y_3 – фільєрна витяжка. (Зауважимо, що кількість показників – критеріїв оптимізації може бути іншою – на математичну та програмну реалізацію це не впливає).

Математична модель задачі, отримана із застосуванням вищеописаних підходів, знайдена в [6]. Задачу багатокритеріальної оптимізації перетворено в однокритеріальну задачу наступного вигляду [7]:

$$F = -0.4750\cdot x_1 - 0.4095\cdot x_2 - 0.5421\cdot x_3 - 2.9493\cdot x_4 - 0.5153\cdot x_1\cdot x_2 -$$
$$-0.7193\cdot x_1\cdot x_3 - 8.0168\cdot x_1\cdot x_4 - 39.0697\cdot x_2\cdot x_3 -$$
$$-7.9289\cdot x_2\cdot x_4 - 13.2600\cdot x_3\cdot x_4 - 148.8703\cdot x_1\cdot x_2\cdot x_3 - 22.4162\cdot x_1\cdot x_2\cdot x_4 -$$
$$-1.2639\cdot x_1\cdot x_3\cdot x_4 + 262.3487\cdot x_2\cdot x_2\cdot x_4 \to \min$$
$$0.2 \le x_1 \le 0.35$$
$$0.65 \le x_2 \le 0.8$$
$$0.001 \le x_3 \le 0.01$$
$$0.01 \le x_4 \le 0.04$$

$$x_1 + x_2 + x_3 + x_4 = 1 \qquad (1)$$

Ця задача потребує подальшого розв'язання з метою знаходження оптимального складу суміші.

Результати та їх обговорення. Маємо справу із задачею умовної оптимізації. Це задача, яка пов'язана з оптимізацією за наявності обмежень на змінні. Дані обмеження зменшують розмір області, у якій шукається оптимум. Процес оптимізації стає складнішим, тому що за наявності обмежень не можна використовувати застосовувані умови оптимальності. Також можливе порушення навіть основної умови, відповідно до якої оптимум має досягатися у стаціонарній точці.

Для переходу від задачі умовної оптимізації із обмеженнями до задачі без обмежень, використовують наступні методи [8], [9], [10]:

- Метод невизначених множників Лагранжа;
- Метод штрафних функцій;
- Метод бар'єрних функцій.

Будемо використовувати метод штрафних функцій. Функція $P(x)$ – це штрафна функція. Потрібно, щоб вона «штрафувала» функцію Z при порушенні обмежень (збільшувала її значення). Тоді мінімум функції Z буде знаходитися усередині області обмежень. Функція $P(x)$, яка задовольняє цій умові, може бути не одною. Задачу мінімізації можна сформулювати наступним чином: мінімізувати функцію $z = f(x)$, при обмеженнях $c_j(x) > 0$, $j = 1, 2, ..., m$. Функцію $P(x)$ зручно записати наступним чином: $P(x) = r \cdot \sum_{j=1}^{m} \frac{1}{c_j(x)}$, де r – досить мала величина. Тоді функція приймає вид $Z = \varphi(x, r) = f(x) + r \cdot \sum_{j=1}^{m} \frac{1}{c_j(x)}$.

Якщо x приймає допустимі значення, тобто значення, для яких $c_j(x) > 0$, то Z приймає значення, які більші відповідних, а різницю можна зменшити за допомогою r, що є досить малою величиною. Якщо x приймає допустимі значення, але які близькі до межі області обмежень, й хоча б одна із функцій $c_j(x)$ є близькою до нуля, то значення функції $P(x)$, а також значення функції Z будуть досить великі. Отже, вплив функції $P(x)$є в утворенні «гребеня із крутими краями» вздовж межі області обмежень. Тож, якщо пошук почнеться із допустимої точки та відбувається мінімізація функції $\varphi(x, r)$ без обмежень, тоді мінімум, звичайно, буде досягатися усередині допустимої області для задач із обмеженнями. Якщо r достатньо мала величина, то щоб вплив $P(x)$став малим у точці мінімуму, необхідно зробити точку мінімуму функції $\varphi(x, r)$ без обмежень, що співпадатиме із точкою мінімуму задач з обмеженнями.

У нашому випадку для задачі (1) побудуємо функцію без обмежень, використовуючи штраф:

$$F = -0.4750 \cdot x_1 - 0.4095 \cdot x_2 - 0.5421 \cdot x_3 - 2.9493 \cdot x_4 - 0.5153 \cdot x_1 \cdot x_2 -$$
$$- 0.7193 \cdot x_1 \cdot x_3 - 8.0168 \cdot x_1 \cdot x_4 - 39.0697 \cdot x_2 \cdot x_3 -$$
$$- 7.9289 \cdot x_2 \cdot x_4 - 13.2600 \cdot x_3 \cdot x_4 - 148.8703 \cdot x_1 \cdot x_2 \cdot x_3 - 22.4162 \cdot x_1 \cdot x_2 \cdot x_4 -$$
$$- 1.2639 \cdot x_1 \cdot x_3 \cdot x_4 + 262.3487 \cdot x_2 \cdot x_2 \cdot x_4 +$$
$$+ r \cdot \left(\frac{1}{x_1 - 0.2} + \frac{1}{0.35 - x_1} + \frac{1}{x_2 - 0.65} + \frac{1}{0.8 - x_2} + \frac{1}{x_3 - 0.001} + \frac{1}{0.01 - x_3} + \right.$$
$$\left. + \frac{1}{x_4 - 0.01} + \frac{1}{0.04 - x_4} + (1 - x_1 - x_2 - x_3 - x_4)^2 \right) \to \min \qquad (2)$$

Чим ближче до мінімуму штраф при $r \to 0$, тим менший градієнт функції. Пошук закінчується, якщо $r_n \le \varepsilon$, де ε – задане досить мале число.

Отже, в результаті застосування методу штрафних функцій, отримали задачу безумовної оптимізації.

Розглянемо підходи до розв’язання задач безумовної оптимізації. Задача багатовимірної безумовної оптимізації сформульована наступним чином: знайти мінімум функції *f(x),* де $x \in R^n$, при відсутності обмежень на *x*, при цьому *f(x)* – це скалярна цільова функція, безперервно диференційована [8], [9], [10].

При вирішенні цього класу задач потрібно враховувати такі фактори:

– характер цільової функції розв'язуваної задачі (одно екстремальна або багато екстремальна);

– можливість отримання в процесі оптимізації інформації про похідні цільової функції;

– наявність різних підходів до організації ітеративної процедури пошуку оптимуму (методи, засновані на ітеративному русі змінних в напрямку, обумовленому тим або іншим способом).

Методи безумовної оптимізації:

Методи прямого пошуку

У методах прямого пошуку мінімуму цільової функції (або методах нульового порядку) використовується інформація лише про значення функції. Багато з цих методів не мають строгого теоретичного обґрунтування і побудовані на основі евристичних міркувань.

– Методи першого порядку

– Методи 2-го порядку (Ньютонівські методи)

Методи випадкового пошуку

Методи випадкового пошуку реалізують ітеративний процес руху оптимізаційних змінних в просторі з використанням випадкових напрямків. Одна з переваг цих методів – достатня простота, методи володіють великим спектром можливих напрямків руху.

Для розв’язання задачі (2) будемо застосовувати градієнтний метод із дробленням кроку методи [10]. Обрання даного методу зумовлене, з одного боку, - достатньою простотою, а з іншого – хорошою збіжністю.

Передбачається, що $f(x)$, ∇f існують і безперервні. Метод заснований на ітераційній процедурі, що обумовлена формулою: $x^{(k+1)} = x^{(k)} + \lambda_k \cdot S_k$, де λ_k – величина кроку, S_k – вектор в напрямку $x^{(k+1)} - x^{(k)}$. Градієнтні методи розрізняються тільки способом визначення λ_k і S_k зазвичай визначається шляхом вирішення задачі оптимізації $f(x)$ в напрямку S_k. Напрямок S_k залежить від того, як апроксимується функція $f(x)$.

Будується послідовність точок $\{x^{(k)}\}$, k=0,1,…, які $f\left(x^{(k+1)}\right) < f\left(x^{(k)}\right)$, k=0,1,….

Точки послідовності $\{x_k\}$ вираховуються за наступним правилом:

$x^{k+1} = x^k - \lambda_k \cdot grad\ f\left(x_k\right)$, k=0,1,…

Початкова точка x_0 і початковий крок λ_0 задаються користувачем. Величину кроку λ_0 не змінюють до тих пір, доки функція спадає в точках послідовності. Умовою закінчення обчислень є виконання нерівностей (близькість до нуля градієнта $grad\ f\left(x^{(k)}\right)$): $\left|\dfrac{df(x^{(k)})}{dx^{(i)}}\right| \le \varepsilon,\ i = 1, 2, ..., n$ чи $\left\|grad\ f\left(x^{(k)}\right)\right\| = \sqrt{\sum_{i=1}^{n}\left[\dfrac{df(x^{(k)})}{dx_i}\right]} \le \varepsilon$, де ε є заданим досить малим числом, якщо умова спадання не виконується, тоді величину кроку зменшують, зазвичай, вдвічі ($\lambda_k = \dfrac{\lambda_k}{2}$) до виконання нерівності $f\left(x^{(k+1)}\right) < f\left(x^{(k)}\right)$ і продовжують обчислення.

Проілюструємо застосування градієнтного методу із дробленням кроку для задачі (2).

1) Задаємо початкову точку $x^{(0)} = \begin{pmatrix} 0.3 \\ 0.675 \\ 0.005 \\ 0.02 \end{pmatrix}$,

початкову величину кроку $\lambda_0 = 0.0000001,\ \varepsilon = 0.01$.

2) Знаходимо частинні похіднів точці $x^{(0)}$: $\left.\dfrac{df}{dx_1}\right|_{x^{(0)}} = -4715$, $\left.\dfrac{df}{dx_2}\right|_{x^{(0)}} = -5739$, $\left.\dfrac{df}{dx_3}\right|_{x^{(0)}} = -49044$, $\left.\dfrac{df}{dx_4}\right|_{x^{(0)}} = -17407$

3) Перевіряємо критерій зупинки за $grad\ f\left(x^{(k)}\right)$.

Маємо $grad\ f\left(x^{(k)}\right) = 52569$.

4) Обчислюємо значення функції в початковій точці $x^{(0)}$: $F(x^{(0)}) = -2757$.

5) Зробимо крок вздовж напрямку антиградієнта:

$$x^{(1)} = x^{(0)} - \lambda_0 \cdot grad\ f(x^{(0)}) = \begin{pmatrix} 0.3 \\ 0.675 \\ 0.005 \\ 0.02 \end{pmatrix} - 0.0000001 \cdot \begin{pmatrix} -4715 \\ -5739 \\ -49044 \\ -17407 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.30047 \\ 0.67557 \\ 0.00499 \\ 0.02174 \end{pmatrix}$$

6) Обчислюємо значення функції в точці $x^{(1)}$: $F(x^{(1)}) = -925$

Так як $F(x^{(1)}) > F(x^{(0)})$, то величину кроку зменшуємо: $\lambda_1 = \dfrac{0.0000001}{2} = 0.00000005$.

7) Повторюємо дії, допоки $grad\ f\left(x^{(k)}\right) < \varepsilon$.

8) Після виконання умови зупинки, на останньому кроці матимемо наступні значення:

$$x^{(n)} = \begin{pmatrix} 0.2752 \\ 0.6943 \\ 0.0055 \\ 0.0250 \end{pmatrix},\ F(x^{(n)}) = -3412,\ grad\ f\left(x^{(n)}\right) = 0.00989\,.$$

В результаті отримані x_1, x_2, x_3, x_4 є оптимальними вмістами компонентів суміші.

Всі описані дії реалізовуються програмно у спеціально створеному програмному забезпеченні [11], [12].

Форма, наведена на рис. 1, візуально відображає реалізацію оптимізації задачі градієнтним методом із дробленням кроку. Початкові значення змінних та крок задаються із форми. Обмеження на змінні задачі зчитуються із файлу x.txt (рис.2).

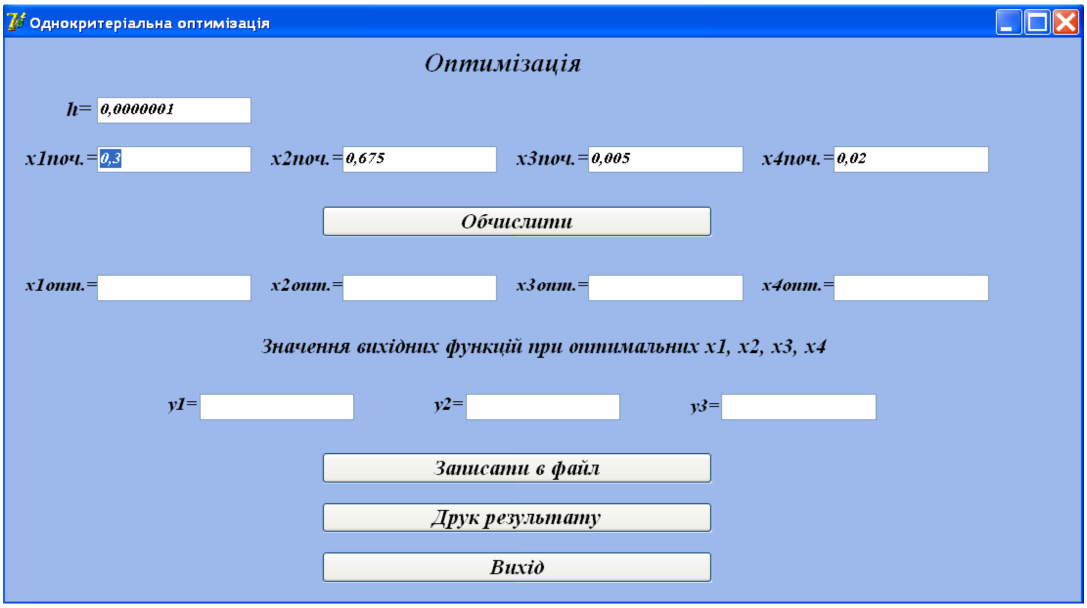

Рис.1. **Форма «Однокритеріальна оптимізація» - введення початкових значень**

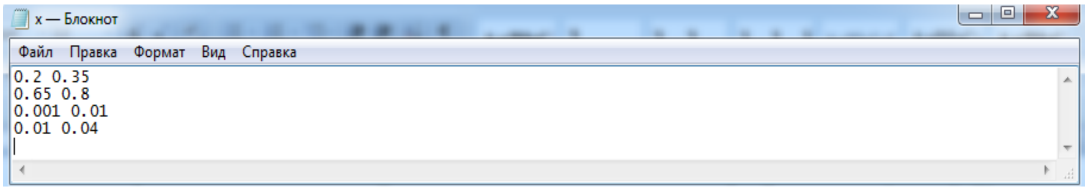

Рис. 2. **Файл x.txt для вводу обмежень на змінні задачі**

Після натиснення кнопки «Обчислити» у відповідних полях з'являться оптимальні значення змінних задачі (рис. 3).

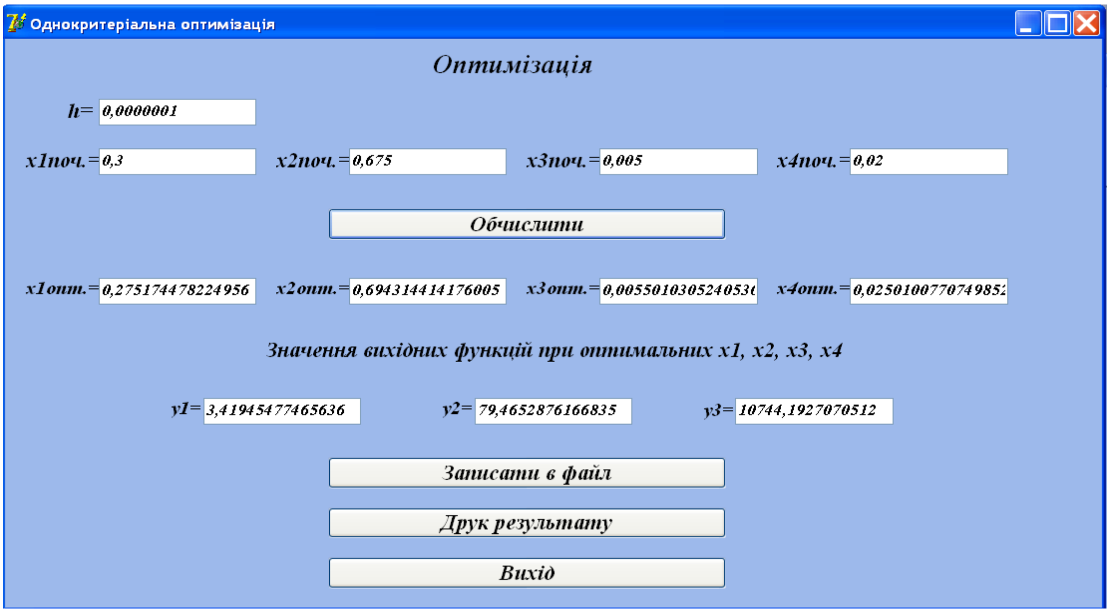

Рис. 3. **Форма «Однокритеріальна оптимізація» - результати обчислення**

Висновки. Таким чином, здійснено багатокритеріальну оптимізацію чотирикомпонентної полімерної сумішевої системи. Для цього:

1. Зведено багатокритеріальну задачу до однокритеріальної за методом лінійної згортки [6].
2. Перетворено задачу умовної оптимізації в задачу безумовної оптимізації за методом штрафних функцій.
3. Знайдено оптимальні значення параметрів задачі за градієнтним методом із дробленням кроку.

Отже, із застосуванням методів штрафних функцій та градієнтного, знайдено оптимальний склад чотирикомпонентної полімерної суміші, що дасть можливість отримувати ультра тонкі модифіковані нановолокна з покращеними властивостями.

Список використаної літератури

1. Глубіш П. А., Ірклей В. М., Цебренко М. В. та ін. «Високотехнологічні конкурентоспроможні і екологічноорієнтовані волокнисті матеріали та вироби з них» - К.: «Арістей», 2007, 263 с.

2. Цебренко М.В. Ультратонкие синтетические волокна. - М.: Химия, 1991. - 214с.

3. Зедгенидзе И. Г. Планирование эксперимента для исследования многокомпонентных систем, М., «Наука», 1976.

4. Ахназарова С.Л., Кафаров В.В. Методы оптимизации эксперимента в химической технологии. – М.: Высшая школа, 1985. – 328 с.

5. V. Rezanova, V. Shchotkina, M. Tsebrenko Planning the experiment and optimization of the content of nanoaddition in polypropylene monothreads / К.: Вісник КНУТД. – 2014. – № 2. – С. 42-47.

6. Резанова В.Г. Дослідження властивостей чотирикомпонентних систем мтодом математичного моделювання / К.: Вісник КНУТД. – 2014. – № 3. – С. 113-120.

7. Резанова В.Г. Перетворення задачі оптимізації при дослідженні чотирикомпонентних сумішей полімерів / К.: Вісник КНУТД. – 2016. – №2 . – С. –40-47.

8. Васильев Ф. П. Методы оптимизации – М.: Факториал Пресс, 2002. – 415 с.

9. Лотов А. В., Поспелова И. И. Конспект лекций по теории и методам многокритериальной оптимизации / А. В. Лотов, И. И. Поспелова– М.: ВМиК МГУ, 2006. – 130 с.

10. Федунец Н.И., Черников Ю.Г. Методы оптимизации. – М.: Горное образование, 2009. – 375 с.

11. Алексєєв М. О. Delphi. Основи програмування / Алексєєв М. О., Кандзюба С. П., Коротенко Л. М., Шевцова О. С. – Д.: Державний ВНЗ «Національний гірничий університет», 2012. – 272 с.

12. Культин Н. Основы программирования в Delphi 7. С-Пб.: БХВ-Петербург, 2011. – 416 с.

ОПТИМИЗАЦИЯ СОСТАВА ЧЕТЫРЕХКОМПОНЕНТНЫХ СМЕСЕЙ ПОЛИМЕРОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДА ШТРАФНЫХ ФУНКЦИЙ

РЕЗАНОВА В.Г.
Киевский национальный университет технологий и дизайна

Цель. Решение задачи оптимизации состава четырехкомпонентных смесей полимеров. Преобразование задачи условной оптимизации к задаче безусловной оптимизации и дальнейшее ее решения. Создание специального программного обеспечения.

Методика. Преобразование задачи условной оптимизации к задаче безусловной оптимизации осуществлялось методом штрафных функций. Решение полученной задачи проводилось градиентным методом с дроблением шага. Программное обеспечение разрабатывалось на языке Object Pascal в среде Delphi.

Результаты. Разработаны математическое и программное обеспечение для решения задачи оптимизации состава четырехкомпонентных смесей полимеров при реализации специфического волокнообразования.

Научная новизна. Разработано математическое и программное обеспечение позволяет решать задачи оптимизации состава четырехкомпонентных смесей полимеров с помощью метода штрафных функций и градиентного метода с дроблением шага. Решение задачи оптимизации является составной частью теоретического исследования специфического волокнообразования.

Практическая значимость. Применение вышеописанных методов обеспечивает нахождение оптимального состава четырехкомпонентной полимерной смеси, что позволит получать ультратонкие модифицированные нановолокна с улучшенными свойствами.

Ключевые слова: *волокнообразование, условная оптимизация, безусловная оптимизация, метод штрафных функций, градиентный метод, программное обеспечение.*

OPTIMIZATION OF THE COMPOSITION OF QUATERNARY POLYMER MIXTURES USING PENALTY FUNCTION METHOD

REZANOVA V.G.
Kiev National University of Technology and Design

Purpose - the solution of the problem of optimizing the composition of the four-component polymer mixtures. Transformation a constrained optimization problem to the unconstrained optimization problem and its further solution. Creation of a special software.

Methods. Transformation of the constrained optimization problem to the problem of unconstrained optimization was carried out by the penalty function. The solution of obtained problem was carried out by the gradient method with crushing step. The software was developed with Object Pascal language in Delphi environment.

Results. The mathematical and program software to solve the problem of optimizing the composition of quaternary polymer mixtures in the implementation of specific fiber-formation was carried out.

Scientific novelty. Developed mathematical and software can be used to solve the problem of optimizing the composition of quaternary mixtures of polymers using penalty function method and the gradient method with a crushing step. Solution of the optimization problem is an integral part of the theoretical study of specific fiber-formation.

Practical significance. Application of the methods described above ensures finding the optimum composition of a four-component polymer blend, which allows to receive the modified ultrathin nanofibers with improved properties.

Keywords: *fiberformation, constrained optimization, unconstrained optimization, penalty function method, gradient method, the software.*